

AlN 半極性面における表面再構成および Al 原子の吸着脱離に関する理論的検討
 Theoretical study for surface reconstructions and adsorption-desorption behavior of Al atom
 on AlN semipolar surfaces

三重大院工, °竹本圭孝, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie Univ., °Takemoto Yoshitaka, Tomonori Ito, Toru Akiyama, Kohji Nakamura

E-mail: 413m613@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】AlN は紫外発光デバイスへの応用が期待されており, 結晶の品質向上のために様々な方法で AlN 結晶が作製されている. 特に近年, c 軸方向に沿った自発分極の影響を抑えるために, 非極性面および半極性面での結晶成長に関する研究が盛んにおこなわれており[1], 半極性面である AlN(1102)面と AlN(1101)面の成長が成長条件(H_2 圧)に依存することを示唆する実験も報告されている[2]. これまでに我々は, 窒化物半導体のエピタキシャル成長過程の面方位および成長条件依存性を明らかにし, AlN の極性面および非極性面についても, 温度と圧力を考慮した表面構造状態図を作成することにより, 成長過程と成長条件および面方位との関係性を明らかにした[3,4]. 本研究では, 第一原理計算を用いて成長条件に依存した半極性 AlN(1102)面と AlN(1101)面における表面再構成を明らかにし, そこでの Al 原子の挙動について理論的に検討する.

【結果および考察】Fig.は温度 T と H_2 圧力(P_{H_2})の関数として示した, AlN(1102)面および(1101)面の表面構造状態図である. 低 H_2 圧力下において, (1102)面は N 原子が脱離した表面(Fig. (a)の $Al_{dim} 2N_{de}$)が最安定となり, (1101)面では, N 原子が脱離してさらに水素が吸着した表面(Fig. (b)の $4N_{de} 3Al-H$)が最安定となる. また, これらの表面における Al の吸着エネルギーは, (1102)面(-3.25eV)よりも(1101)面(-2.49eV)の方が低く, (1102)面で Al 原子が吸着し易い. 一方, 高 H_2 圧力下においては, (1102)面上に水素が吸着した表面(Fig.(a)の $2N_{de} 3Al-H$)が出現する. この表面における吸着エネルギー(-2.00eV)は, 低 H_2 圧力下のものよりも低く, 高 H_2 圧力下において Al 原子が吸着しにくい. これらの半極性面は, N が水素で終端された半極性 GaN(1101)面の表面構造[5]と異なり Al が水素で終端された表面が安定となる. 以上の結果は, 成長条件に依存した表面構造の変化およびそこでの成長過程が, 半極性面 AlN の成長においても重要であることを示唆している.

【参考文献】[1]R. Armitage *et al.*:Appl. Phys. Lett. **88** (2006) 011908. [2] 市川 他: 第 60 回応用物理学会学術講演会 29a-G21-6 (2013). [3] T. Akiyama *et al.*: Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012) 018001. [4] T. Akiyama *et al.*: Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012) 048002. [5] T. Akiyama *et al.*: Phys. Rev. B **81** (2010) 245317.

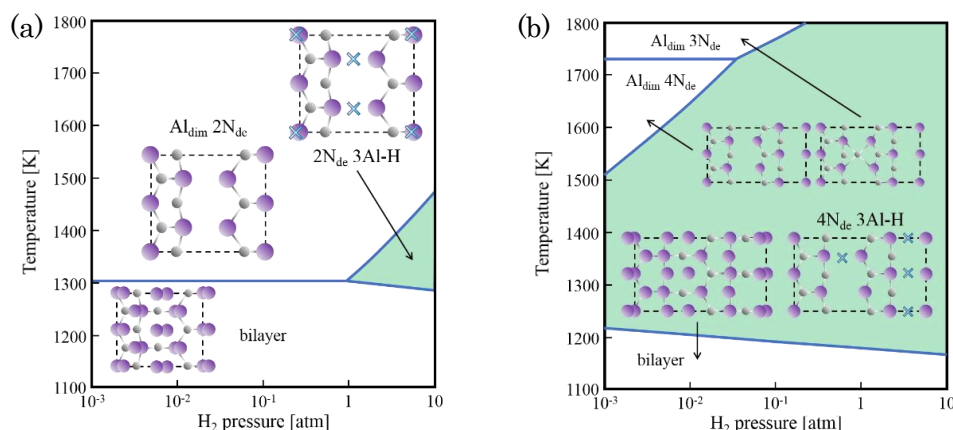


Fig.: Calculated surface phase diagrams of (a) AlN(1102) and (b) AlN(1101) surfaces as functions of temperature and H_2 pressure at Al pressure of 1.32×10^{-6} atm (1×10^{-3} Torr). The hydrogen incorporated surfaces are stabilized in the regions emphasized by shaded areas. Top views of surface structures are also shown. Large, small circles, and crosses represent Al, N, and H atoms, respectively.